A.KADDOURI

SMP/S4 - Méc. Quantique
Complément de la Série 4

Exercice 1

$$H = \frac{\omega}{\hbar}\left(L_x^2 - L_y^2\right) \quad ; \quad \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\} \text{ base orthonormée}$$

1°/ a) La $j^{\text{ième}}$ colonne d'une matrice, représentant un opérateur dans une base donnée, correspond au résultat de l'action de cet opérateur sur le $j^{\text{ème}}$ ket de la base. L_x et L_y sont donc représentés par les matrices :

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad L_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

A opérateur hermitique si $A^+ = A$ soit : $(A^+)_{nm} = (A)^*_{mn} = (A)_{nm}$

Ceci étant réalisé pour les matrices L_x et L_y $\Rightarrow$ L_x et L_y sont hermitiques.

b)

$$L_x^2 = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$L_y^2 = -\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow H = \frac{\omega\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{soit} \quad \mathbf{H} = \hbar\omega\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

et on a bien $H|u_1\rangle = \hbar\omega|u_3\rangle$, $H|u_2\rangle = 0$, $H|u_3\rangle = \hbar\omega|u_1\rangle$

<u>Remarque</u> : on peut trouver ces résultats en appliquant $H = \frac{\omega}{\hbar}(L_x^2 - L_y^2)$ à chacun des kets de la base. Par exemple ; on a :

$$L_x^2|u_1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}L_x|u_2\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(|u_1\rangle + |u_3\rangle\right)$$

$$\text{et} \quad L_y^2|u_1\rangle = i\frac{\hbar}{\sqrt{2}}L_y|u_2\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(|u_1\rangle - |u_3\rangle\right)$$

$\Rightarrow H|u_1\rangle = \hbar\omega|u_3\rangle$ et même raisonnement pour $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$.

c) équation caractéristique : $\det(H - \lambda I) = 0 \Rightarrow -\lambda^3 + \lambda(\hbar\omega)^2 = 0$

$$\Rightarrow \lambda\left(\lambda^2 - (\hbar\omega)^2\right) = 0 \Rightarrow \lambda = 0, \hbar\omega, -\hbar\omega.$$

les énergies du système sont donc : $E_1 = 0$, $E_2 = \hbar\omega$ et $E_3 = -\hbar\omega$.

à E_k est associé le ket propre $|\phi_k\rangle = a_k|u_1\rangle + b_k|u_2\rangle + c_k|u_3\rangle$, $k=1,2,3$

⊛ Pour $E_1 = 0$ on a $H|\phi_1\rangle = 0 \Rightarrow a_1 = c_1 = 0$

avec $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1 \Rightarrow |b_1|^2 = 1 \Rightarrow b_1 = e^{i\alpha_1}$

donc $|\phi_1\rangle = |u_2\rangle$ à un facteur de phase global près.

⊛ Pour $E_2 = \hbar\omega$, on a $H|\phi_2\rangle = \hbar\omega|\phi_2\rangle \Rightarrow a_2 = c_2$ et $b_2 = 0$

avec $\langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1 \Rightarrow 2|a_2|^2 = 1 \Rightarrow a_2 = \sqrt{\frac{1}{2}}\, e^{i\alpha_2}$

$\Rightarrow |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_1\rangle + |u_3\rangle\right)$ à un facteur de phase global près

⊛ Pour $E_3 = -\hbar\omega \Rightarrow H|\phi_3\rangle = -\hbar\omega|\phi_3\rangle \Rightarrow a_3 = -c_3$ et $b_3 = 0$

avec $\langle\phi_3|\phi_3\rangle = 1 \Rightarrow a_3 = \sqrt{\frac{1}{2}}\, e^{i\alpha_3}$

$\Rightarrow |\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_1\rangle - |u_3\rangle\right)$ à un facteur de phase global près

Remarque : on peut trouver $|\phi_3\rangle$ en utilisant : $\langle\phi_1|\phi_3\rangle = 0$, $\langle\phi_2|\phi_3\rangle = 0$ et $\langle\phi_3|\phi_3\rangle = 1$.

2°) a) $L_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

L_z est représenté par une matrice diagonale dont les éléments sont réels $\Rightarrow L_z$ est hermitique

les kets propres de L_z sont les $|u_k\rangle$ de la base

$\Rightarrow L_z$ est une observable

vp de L_z : $+\hbar, 0, -\hbar$ associés aux $\vec{vp}$ $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ respectivement.

b) à $t=0$, l'état du système est décrit par $|\psi_{t=0}\rangle = |u_1\rangle$

De manière générale, la mesure de L_z donne l'une des valeurs propres de L_z càd : $+\hbar$, 0, ou $-\hbar$. Ici le système se trouve initialement dans $|u_1\rangle$, ket propre de L_z associé à la valeur propre $+\hbar$, on a alors :

$\mathcal{P}_0(+\hbar) = |\langle u_1|\psi_{t=0}\rangle|^2 = |\langle u_1|u_1\rangle|^2 = 1 \Rightarrow$ la valeur $+\hbar$ est <u>certaine</u>.

et on a bien : $\mathcal{P}_0(-\hbar) = |\langle u_3|u_1\rangle|^2 = 0$ et $\mathcal{P}_0(0) = |\langle u_2|u_1\rangle|^2 = 0$

c) Le système étant conservatif $\Rightarrow |\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_{t=0}\rangle = F(H)|\psi_{t=0}\rangle$

avec $|\psi_{t=0}\rangle = \sum_k c_k(t=0)|\phi_k\rangle \Rightarrow |\psi_t\rangle = \sum_k c_k(t=0)\, F(H)|\phi_k\rangle$

sachant que $H|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle \Rightarrow F(H)|\phi_k\rangle = F(E_k)|\phi_k\rangle$

$\Rightarrow |\psi_t\rangle = \sum_k c_k(t=0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}|\phi_k\rangle$ avec $c_k(t=0) = \langle\phi_k|\psi_{t=0}\rangle$

Soit $|\psi_t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{+i\omega t}|\phi_3\rangle$

à $t=0$ on a $|\psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_3\rangle$ (qui n'est rien autre que $|u_1\rangle$)

$|\psi_t\rangle$ et $|\psi_{t=0}\rangle$ ne diffèrent pas par un facteur de phase global

$\Rightarrow |\psi_t\rangle$ et $|\psi_{t=0}\rangle$ sont deux kets discernables.

d) $|\Psi_t\rangle = C_2(t)\,|\phi_2\rangle + C_3(t)\,|\phi_3\rangle$ avec $C_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t}$ et $C_3(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega t} = C_2^*(t)$.

D'après 1°) c) on a : $|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle + |u_3\rangle)$ et $|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle - |u_3\rangle)$.

$$\Rightarrow |\Psi_t\rangle = \left[\frac{C_2(t) + C_2^*(t)}{\sqrt{2}}\right]|u_1\rangle + \left[\frac{C_2(t) - C_2^*(t)}{\sqrt{2}}\right]|u_3\rangle$$

Comme $C_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\omega t - i\sin\omega t) \Rightarrow C_2(t) + C_2^*(t) = 2\,\mathcal{R}_e\, C_2(t) = \sqrt{2}\cos\omega t$

et $C_2(t) - C_2^*(t) = 2i\,\mathrm{Im}\,C_2(t) = -i\sqrt{2}\sin\omega t$

$$\Rightarrow |\Psi_t\rangle = \cos\omega t\,|u_1\rangle - i\sin\omega t\,|u_3\rangle$$

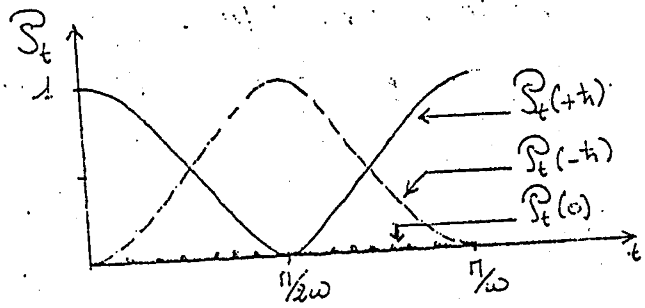
$\mathcal{P}_t(+\hbar) = |\langle u_1|\Psi_t\rangle|^2 = \cos^2\omega t$

$\mathcal{P}_t(0) = |\langle u_2|\Psi_t\rangle|^2 = 0$

$\mathcal{P}_t(-\hbar) = |\langle u_3|\Psi_t\rangle|^2 = \sin^2\omega t$

on vérifie que l'on a bien $\sum \mathcal{P} = 1$

Remarque : Ces résultats montrent encore une fois que $|\Psi_t\rangle$ et $|\Psi_{t=0}\rangle$ sont des kets bien distincts.



$\mathcal{P}_t(0)$ étant nulle $\forall t$
$\mathcal{P}(+\hbar)$ varie en sens inverse de $\mathcal{P}(-\hbar)$ de telle sorte qu'à un instant t donné on a $\mathcal{P}(+\hbar) + \mathcal{P}(-\hbar) = 1$.
En particulier $\mathcal{P}(+\hbar)$ est minimale quand $\mathcal{P}(-\hbar)$ est maximale et inversement.

3°) $\langle L_\mu\rangle_t = \langle\Psi_t|L_\mu|\Psi_t\rangle$ avec $\mu = x, y, z$.

Dans la base $\{|u_k\rangle\}$ on a $|\Psi_t\rangle = \begin{pmatrix}\cos\omega t\\ 0\\ -i\sin\omega t\end{pmatrix} \Rightarrow \langle\Psi_t| = (\cos\omega t, 0, +i\sin\omega t)$

Par exemple pour $\mu = z$, on aura :

$$\langle L_z\rangle_t = \hbar\,(\cos\omega t,\ 0,\ i\sin\omega t)\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\omega t\\ 0\\ -i\sin\omega t\end{pmatrix}$$

$\langle L_z\rangle = \hbar(\cos^2\omega t - \sin^2\omega t) = \hbar(1 - 2\sin^2\omega t)$ soit $\langle L_z\rangle_t = \hbar\cos 2\omega t$

même raisonnement pour $\mu = x, y$, on obtient $\langle L_x\rangle_t = \langle L_y\rangle_t = 0$.

on voit donc : le vecteur $\langle\vec{L}\rangle_t$ varie en module mais garde une direction fixe (celle de l'axe Oz) $\Rightarrow$ [redacted] $\langle\vec{L}\rangle_t$ vibre en permanence, le long de Oz, avec la fréquence $2\omega/2\pi$.

Alors qu'à $t=0$ on a $\langle L_z\rangle_0 = \langle\Psi_{t=0}|L_z|\Psi_{t=0}\rangle = \langle u_1|L_z|u_1\rangle$
$= \hbar\langle u_1|u_1\rangle = \hbar$.

A. KADDOURI

Exercice 2

$$|\Psi_{t=0}\rangle = \sum_{n=0}^{3} C_n(t=0)\,|\phi_n\rangle \quad \text{avec} \quad C_n(t=0) = \langle\phi_n|\Psi_{t=0}\rangle$$

on a : $C_0(t=0) = \frac{1}{2}$; $C_1(t=0) = -\frac{i}{2\sqrt{2}}$; $C_2(t=0) = \frac{i}{\sqrt{2}}$ et $C_3(t=0) = \frac{1}{2\sqrt{2}}$

et on a aussi $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ avec $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$; $n = 0, 1, 2, 3$

Notons que $\langle\Psi_{t=0}|\Psi_{t=0}\rangle = \sum_{n=0}^{3} |C_n(t=0)|^2 = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{2} + \frac{1}{8} = 1$

1°) La valeur $\frac{5}{2}\hbar\omega = E_2$ correspondant à $|\phi_2\rangle$

Postulat de mesure $\Rightarrow$ $\mathcal{P}_{t=0}(E_2) = |\langle\phi_2|\Psi_{t=0}\rangle|^2 = |C_2(t=0)|^2 = \frac{1}{2}$

2°) • $\langle H\rangle_0 = \langle\Psi_{t=0}|H|\Psi_{t=0}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |C_n(t=0)|^2 E_n \Rightarrow \langle H\rangle_0 = 2\hbar\omega$

• $(\Delta H)_0^2 = \langle H^2\rangle_0 - \langle H\rangle_0^2$ avec $\langle H^2\rangle_0 = \langle\Psi_{t=0}|H^2|\Psi_{t=0}\rangle$

avec $H^2|\Psi_{t=0}\rangle = H^2\sum_{n=0} C_n(t=0)\,|\phi_n\rangle = \sum_{n=0}^{3} C_n(t=0)\, E_n^2\,|\phi_n\rangle$

$\Rightarrow \langle H^2\rangle_0 = \sum |C_n(t=0)|^2 E_n^2$ soit $\langle H^2\rangle_0 = 5(\hbar\omega)^2$

et donc : $(\Delta H)_0^2 = 5(\hbar\omega)^2 - 4(\hbar\omega)^2 \Rightarrow (\Delta H)_0 = \hbar\omega$

3°) a) H étant observable $\Rightarrow |\Psi_t\rangle = \sum_n C_n(t)\,|\phi_n\rangle$ avec $C_n(t) = \langle\phi_n|\Psi_t\rangle$

Système conservatif $\Longrightarrow$ $C_n(t) = C_n(t=0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

$$\Rightarrow |\Psi_t\rangle = \frac{1}{2} e^{-\frac{i\omega t}{2}}|\phi_0\rangle - \frac{i}{2\sqrt{2}} e^{-i\frac{3\omega t}{2}}|\phi_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-\frac{i5\omega t}{2}}|\phi_2\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} e^{-\frac{i7\omega t}{2}}|\phi_3\rangle$$

et notons que $|C_n(t)| = |C_n(t=0)|$. $\langle\Psi_t|\Psi_t\rangle = \sum |C_n(t)|^2 = \sum |C_n(t=0)|^2 = 1$

Remarque : On peut aussi utiliser le fait que :

le système est conservatif $\Rightarrow |\Psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\Psi_{t=0}\rangle = F(H)|\Psi_{t=0}\rangle$

et on aura : $|\Psi_t\rangle = \sum_n C_n(t=0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\phi_n\rangle$.

$= \text{------}.$

b)
- $\mathcal{P}_t(E_2) = |\langle \phi_2 | \psi_t \rangle|^2 = |C_2(t)|^2 = |C_2(t=0)|^2 = \mathcal{P}_{t=0}(E_2) = \frac{1}{2}$
- $\langle H \rangle_t = \langle \psi_t | H | \psi_t \rangle = \sum_{n=0}^{3} |C_n(t)|^2 E_n = \sum_{n=0} |C_n(t=0)|^2 E_n = \langle H \rangle_0$
- $(\Delta H)_t = (\Delta H)_0 = \hbar\omega$ puisque :

$$\langle H^2 \rangle_t = \langle \psi_t | H^2 | \psi_t \rangle = \sum_{n=0}^{3} |C_n(t)|^2 E_n^2 = \sum |C_n(t=0)|^2 E_n^2 = \langle H^2 \rangle_0$$

Ces résultats sont prévisibles car l'énergie est une constante de mouvement (système conservatif).

---

4) $E = \frac{7\hbar\omega}{2} \Rightarrow n = 3$ est associé à $|\phi_3\rangle$ et obtenue avec $\mathcal{P}_t(E_3) = \frac{1}{8}$

L'état du système immédiatement après la mesure **est d'après postulat :**

$$\frac{P_3 |\psi_t\rangle}{\sqrt{\langle \psi_t | P_3 | \psi_t \rangle}} = |\varphi\rangle \quad \text{avec} \quad P_3 = |\phi_3\rangle\langle\phi_3|$$

($\frac{7\hbar\omega}{2}$ est vp non dégénérée)

$\Rightarrow P_3|\psi_t\rangle = |\phi_3\rangle\langle\phi_3|\psi_t\rangle = C_3(t)|\phi_3\rangle$ et $\langle\psi_t|P_3|\psi_t\rangle = |C_3(t)|^2$

$$\Rightarrow |\varphi\rangle = e^{-i\frac{7\omega t}{2}}|\phi_3\rangle \equiv |\phi_3\rangle$$

facteur de phase global est sans signification physique

Le système étant dans $|\phi_3\rangle$, si on mesure à nouveau l'énergie, on trouverait $E_3 = \frac{7\hbar\omega}{2}$ mais cette fois-ci avec une probabilité $\mathcal{P}(E_3) = |\langle\phi_3|\phi_3\rangle|^2 = 1$ c à d avec certitude.

$$|\psi_t\rangle \xrightarrow{E_3} |\varphi\rangle \equiv |\phi_3\rangle \xrightarrow{E_3} |\phi_3\rangle$$

$\mathcal{P}(E_3) = |\langle\phi_3|\psi_t\rangle|^2 = 1/8$

$\mathcal{P}(E_3) = |\langle\phi_3|\phi_3\rangle|^2 = 1$

A. KADDOURI

ex. 3 | $k=2 \Rightarrow V(X) = V_0 X^2 \Rightarrow \langle V(x)\rangle = \langle T\rangle$

a) Théorème d'Ehrenfest

- $\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi_t|[X,H]|\Psi_t\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi_t|\frac{i\hbar}{m}P_x|\Psi_t\rangle_t = \langle P/m\rangle_t$
- $\frac{d}{dt}\langle P\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi_t|[P_x,H]|\Psi_t\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi_t|-i\hbar 2V_0 X|\Psi_t\rangle = -2V_0\langle x\rangle_t$

b)
- $\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle_t = \frac{d}{dt}\langle P/m\rangle_t = -\frac{2V_0}{m}\langle x\rangle_t = -\omega^2\langle x\rangle_t$

  soit $\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle_t + \omega^2\langle x\rangle_t = 0$ (i)
- $\frac{d^2}{dt^2}\langle P\rangle_t = -2V_0\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t = -\frac{2V_0}{m}\langle P\rangle_t$

  Soit $\frac{d^2}{dt^2}\langle P\rangle_t + \omega^2\langle P_x\rangle_t = 0$ (ii)

c) les équations différentielles (i) et (ii) s'intègrent aisément, soit :

$$\begin{cases}\langle x\rangle_t = A\cos\omega t + B\sin\omega t\\ \langle P_x\rangle_t = A'\cos\omega t + B'\sin\omega t\end{cases}$$

A, B, A', B' sont les constantes d'intégration à déterminer par les conditions initiales

$t=0$ $\langle x\rangle_{t=0} = x_0$ or $\langle x\rangle_{t=0} = A \Rightarrow A = x_0$

$\langle P_x\rangle_{t=0} = P_0$ or $\langle P\rangle_{t=0} = A' \Rightarrow A' = P_0$

Par ailleurs,

$\frac{d}{dt}\langle x\rangle_t = -\omega A\sin\omega t + \omega B\cos\omega t = \langle P/m\rangle_t$

et $\frac{d}{dt}\langle P\rangle_t = -\omega A'\sin\omega t + \omega B'\cos\omega t = -2V_0\langle x\rangle_t$

à $t=0$
- $\frac{d}{dt}\langle x\rangle_{t=0} = \omega B = \langle P/m\rangle_{t=0} = \frac{P_0}{m} \Rightarrow B = P_0/m\omega$
- $\frac{d}{dt}\langle P\rangle_{t=0} = \omega B' = -2V_0\langle x\rangle_{t=0} = -2V_0 x_0 \Rightarrow B' = -\frac{2V_0}{\omega}x_0 = -m\omega x_0$

En définitive on a :

$$\begin{cases}\langle x\rangle_t = x_0\cos\omega t + \frac{P_0}{m\omega}\sin\omega t\\ \langle P\rangle_t = P_0\cos\omega t - m\omega x_0\sin\omega t\end{cases}$$

d) Nous avons établi $\langle \phi_n|P|\phi_n\rangle = 0$

donc si $|\Psi_{t=0}\rangle = |\phi_n\rangle \Rightarrow \langle P\rangle_{t=0} = 0$ il en est de même pour $\langle x\rangle_{t=0} = 0$

Par suite $\langle x\rangle_t = 0$ et $\langle P\rangle_t = 0$: la position et l'impulsion sont dans ce cas des constantes de mouvement.

Exercice 4

1°) $\mathcal{H}(\vec{p},\vec{r},t) = \frac{1}{2m}\left\{\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right\}^2 + qU(\vec{r},t)$

$= \frac{1}{2m}\left\{p^2 - 2q\vec{p}.\vec{A} + q^2A^2\right\} + qU$

symétrisation $\rightarrow$ $\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left\{p^2 - q\left[\vec{p}.\vec{A} + \vec{A}.\vec{p}\right] + q^2A^2\right\} + qU$

Principe Corresp. $\rightarrow$ $\mathcal{H} \rightarrow H$, $\vec{p} \rightarrow \vec{P}$, $\vec{r} \rightarrow \vec{R}$, $\vec{A} \rightarrow \vec{A}$, $U \rightarrow U$

soit $H(\vec{P},\vec{R},t) = \frac{1}{2m}\left\{P^2 - q\left[\vec{P}.\vec{A}(\vec{R},t) + A(\vec{R},t).\vec{P}\right] + q^2A^2(\vec{R},t)\right\} + qU(\vec{R},t)$

avec $P^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$

2) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle$; Représent. $[\vec{r}] \Rightarrow \langle\vec{r}|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_t\rangle = \langle\vec{r}|H|\psi_t\rangle$.

D'après série 3, on sait : $\langle\vec{r}|\vec{P}|\psi_t\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi_t(\vec{r}) \Rightarrow \langle\vec{r}|P^2|\psi_t\rangle = -\hbar^2\Delta\psi_t(\vec{r})$

De même on sait : $\langle\vec{r}|R|\psi_t\rangle = \vec{r}\langle\vec{r}|\psi_t\rangle = \vec{r}\,\psi_t(\vec{r})$

et $\langle\vec{r}|F(\vec{R})|\psi_t\rangle = F(\vec{r})\langle\vec{r}|\psi_t\rangle = \mathcal{F}(\vec{r})\,\psi_t(\vec{r})$ } Opérateurs multiplicatifs

où $\mathcal{F}$ est la fonction de grandeurs représentée par la fonction F d'opérateurs

on a aussi : $\langle\vec{r}|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\vec{r}|\psi_t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t(\vec{r})$.

$$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_t(\vec{r}) - \frac{q}{2m}\frac{\hbar}{i}\left[\vec{\nabla}.\vec{A}(\vec{r},t) + \vec{A}(\vec{r},t)\vec{\nabla}\right]\psi_t(\vec{r}) + \frac{q^2}{2m}A^2(\vec{r},t)\,\psi_t(\vec{r}) + qU(\vec{r},t)\,\psi_t(\vec{r})$$

que l'on peut écrire :

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_t(\vec{r}) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{q\hbar}{2mi}\,\mathrm{div}\vec{A}(\vec{r},t) - \frac{q\hbar}{2mi}\vec{A}(\vec{r},t)\,\overrightarrow{\mathrm{grad}} + \frac{q^2}{2m}A^2(\vec{r},t) + qU(\vec{r},t)\right\}\psi_t(\vec{r}) \right]$$

<u>Remarque</u> on peut calculer $\langle\vec{r}|\vec{A}\vec{P}|\psi\rangle$ en utilisant la relation de fermeture :

$\langle\vec{r}|\vec{A}(\vec{R}).\vec{P}|\psi\rangle = \int\langle\vec{r}|\vec{A}(\vec{R})|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|\vec{P}|\psi\rangle\, d^3r'$

avec $\langle\vec{r}\,'|\vec{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,')$ et $\langle\vec{r}|\vec{A}(\vec{R})|\vec{r}\,'\rangle = \vec{A}(\vec{r})\underbrace{\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle}_{\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')}$

$\rightarrow \langle\vec{r}|A(\vec{R}).\vec{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\int\vec{A}(\vec{r})\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,')\,d^3r' = \frac{\hbar}{i}\vec{A}(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$

on peut procéder de la même manière pour $\langle\vec{r}|\vec{P}.\vec{A}|\psi\rangle$.